На правах рукописи

Литвинец Федор Николаевич

Квазиклассические спектральные серии нелинейного оператора типа Хартри

Специальность 01.04.02 – теоретическая физика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2007

Работа выполнена на кафедре высшей математики и математической физики Томского политехнического университета

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой высшей
математики и математической физики
Томского политехнического университета — Трифонов Андрей Юрьевич

Научный консультант:
доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
теоретической физики Томского
государственного университета — Шаповалов Александр Васильевич

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук,
профессор, проректор по научной работе
Северской государственной
технологической академии — Носков Михаил Дмитриевич

доктор физико-математических наук,
профессор кафедры динамических систем
Омского государственного университета — Широков Игорь Викторович

Ведущая организация: Институт оптики атмосферы СО РАН

Защита состоится “20” декабря 2007 г. в 14^{30} час. на заседании диссертационного совета Д 212.267.07 по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора физико-математических наук при Томском государственном университете по адресу: 634050, Томск, пр. Ленина, 36

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного университета

Автореферат разослан “ ” ноября 2007 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор — И.В. Ивонин

Общая характеристика работы

В диссертации развит аналитический метод построения решений спектральной задачи для многомерного нелинейного уравнения типа Хартри и рассмотрены его приложения в теории фазы Берри и бозе-эйнштейновского конденсата.

Актуальность темы

Актуальной проблемой современной теоретической физики является разработка точных и приближенных методов интегрирования нелинейных уравнений, которые служат основой построения моделей в квантовой теории многочастичных систем, в нелинейной оптике, в биофизике при описании коллективных возбуждений в молекулярных цепочках и др.

Развитие новых лазерных технологий и их применение к исследованию ансамблей когерентных атомов привело к выдающимся достижениям в создании и исследовании бозе–эйнштейновских конденсатов паров атомов щелочных металлов. В свою очередь, эти достижения стимулировали построение теоретических моделей, описывающих поведение нелинейных систем во внешних полях. В моделях бозе–эйнштеновского конденсата широко используются локальное и нелокальное уравнения Гросса–Питаевского (которое в математической литературе принято называть уравнением типа Хартри). Таким образом, разработка методов построения решений нелинейного уравнения типа Хартри необходима для эффективного анализа этих систем.

Возможности точного интегрирования многомерных уравнений с нелокальной нелинейностью ограничены. Поэтому во многих случаях лишь асимптотические методы, среди которых наиболее эффективным является квазиклассическое приближение, позволяют найти в аналитическом виде решения, описывающие поведение нелинейных систем.

В квантовых вычислениях, интенсивно развивающихся в последнее время, обсуждается возможность использования геометрических фаз в некоторых видах квантовых гейтов — так называемых геометрических гейтах. Последние имеют преимущество перед обычными (не геометрическими) фазовыми гейтами, так как обладают большей отказоустойчивостью. Примером технической реализации квантовых битов (кубитов) являются охлажденные ионы в линейной ловушке Пауля. В такой системе каждый ион реализует кубит, а выполнение логической операции управляется внешним электромагнитным полем, создаваемым излучением лазера, источником магнитного поля и др. Следует также учитывать коллективные взаимодействия ионов, так как состояния ионов определяются не только внешним полем, но и их коллективным взаимодействием. Учет взаимодействия между элементами может приводить к нелинейным моделям, где, в частности, используется уравнение типа Хартри. Таким образом, изучение геометрических фаз для нелинейных моделей, в том числе с помощью квазиклассических методов, представляет интерес в современных разделах квантовой теории и их приложениях.

Цель работы

Целью работы является развитие асимптотических методов интегрирования нелинейного стационарного уравнения типа Хартри, построение решений для конкретных моделей и применение полученных результатов для анализа физических систем.

Научная новизна

Впервые получены асимптотические решения многомерного нелинейного стационарного уравнения типа Хартри на основе развитого в диссертации метода построения квазиклассических спектральных серий нелинейного оператора типа Хартри. Показано, что результаты работы могут быть использованы в исследованиях бозе–эйнштейновского конденсата и теории геометрических фаз нелинейных уравнений.

Основные результаты

В работе впервые получены следующие основные результаты:

1. Предложен асимптотический метод построения решений стационарного нелинейного уравнения типа Хартри. С точностью до $O(\hbar^{3/2})$, $\hbar \to 0$, построены квазиклассические спектральные серии нелинейного оператора типа Хартри с произвольным гладким потенциалом, отвечающие точке покоя классической системы Гамильтона–Эренфеста.

2. В явном виде построены точные спектральные серии для одномерного квадратичного оператора типа Хартри с внешним полем обобщенного гармонического осциллятора и для трехмерного квадратичного оператора типа Хартри с внешним полем гармонического осциллятора и однородного магнитного поля.

3. Развит метод построения квазиклассически сосредоточенных решений нелинейного уравнения типа Хартри при адиабатическом изменении параметров системы.

4. Построены квазиклассические фазы Берри для уравнения типа Хартри с произвольным гладким потенциалом, адиабатически меняющимся со временем.

5. Построенные квазиклассически сосредоточенные состояния уравнения типа Хартри применяются для расчета характеристик бозе-эйнштейновского конденсата. Показано качественное соответствие полученных результатов с известными теоретическими и экспериментальными данными.

Теоретическая и практическая ценность работы

Результаты диссертации представляют интерес с точки зрения развития методов интегрирования нелинейных моделей теоретической физики. На примере нелинейного уравнения типа Хартри показана эффективность метода квазиклассически сосредоточенных функций при построении асимптотических решений нелинейных уравнений.

Построение квазиклассических спектральных серий для нелинейного стационарного уравнения типа Хартри представляет интерес с точки зрения проблемы соответствия квантовых и классических (нелинейных) систем.

Развитый метод построения асимптотических решений показал свою эффективность в теории бозе-эйнштейновского конденсата, в моделях которого используется уравнение типа Хартри (нелокальное уравнение Гросса–Питаевского).

Полученные результаты могут быть использованы в теории геометрических фаз нелинейных уравнений. Геометрические фазы могут найти приложение в теории квантовых вычислений, где нелинейные модели для систем взаимодействующих частиц представляют интерес с точки зрения описания элементной базы квантовых компьютеров. Результаты работы могут быть полезны для математического моделирования геометрических гейтов для кубитов, построенных не на одной частице (например, ионе в гармонической ловушке), а на когерентном ансамбле взаимодействующих частиц.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Метод построения квазиклассических спектральных серий нелинейного оператора типа Хартри, отвечающих точке покоя классической системы Гамильтона–Эренфеста. На основе развитого метода получены явные выражения для ква-

зиклассических спектральных серий (mod $\hbar^{3/2}$) нелинейного оператора типа Хартри общего вида с гладким потенциалом.

2. Точные спектральные серии для одномерного квадратичного оператора типа Хартри с внешним полем обобщенного гармонического осциллятора и для трехмерного квадратичного оператора типа Хартри с внешним полем гармонического осциллятора и однородного магнитного поля. С помощью построенных решений получены аналитические выражения для плотности и поля скоростей бозе-эйнштейновского конденсата, зависимость которых от параметров внешнего поля и количества частиц системы согласуется с результатами экспериментов и других теоретических исследований.

3. Метод построения квазиклассических решений нелинейного уравнения типа Хартри в условиях адиабатической эволюции. На основе метода построены фазы Берри в нелинейных моделях в квазиклассическом приближении. Показано, что, как и в линейном случае, решение уравнения типа Хартри в адиабатическом приближении остается собственной функцией мгновенного гамильтониана.

4. Явные выражения для фаз Берри одномерного и трехмерного уравнения типа Хартри с квадратичным потенциалом. С помощью численного моделирования показано соответствие аналитических выражений для фазы Берри и предельных значений фазы квазиклассически сосредоточенного состояния при больших периодах эволюции.

Апробация диссертации и публикации

Результаты диссертации докладывались на международных конференциях:

— XVI международной летней школе–семинаре по современным проблемам теоретической и математической физики. 22 июня - 03 июля 2004 г., Казань;

— XVII международной летней школе–семинаре по современным проблемам теоретической и математической физики. 22 июня - 03 июля 2005 г., Казань;

— International seminar "Days on Diffraction'2005". June 28 - July 01, 2005. St. Petersburg,

— International seminar "Days on Diffraction'2006". May 30 - June 02, 2006. St. Petersburg,

— International conference "Days on Diffraction'2007". May 29 - June 01, 2007. St. Petersburg, а также на научных семинарах кафедры высшей математики и математической физики Томского политехнического университета, кафедр теоретической физики и квантовой теории поля Томского государственного университета, кафедре прикладной математики Московского института электроники и математики.

По теме диссертации опубликовано 7 статей в отечественной и зарубежной научной печати, а также 5 тезисов докладов на всероссийских и международных конференциях.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка цитируемой литературы, содержащего 150 библиографических ссылок. Общий объем диссертации составляет 103 страницы. Работа содержит 8 рисунков.

Краткое содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, проведен краткий обзор литературы и установлена связь результатов, представленных в диссертации, с результатами работ других авторов. Дано описание структуры диссертации и сформулированы основные задачи, решаемые в ней.

В **первой главе диссертации** подробно описывается метод построения асимптотических решений задачи Коши для нелинейного уравнения типа Хартри

$$\{-i\hbar\partial_t + \widehat{H}_\varkappa(t)\}\Psi = 0, \quad \Psi \in L_2(\mathbb{R}^n_x), \tag{1}$$

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar)|_{t=0} = \psi(\vec{x}, \hbar), \tag{2}$$

где действие оператора типа Хартри определяется формулой

$$\widehat{H}_\varkappa(t)\Psi = (\widehat{H}(t) + \varkappa\widehat{V}(t, \Psi))\Psi. \tag{3}$$

Здесь

$$\widehat{H}(t) = H(\hat{z}, t), \quad \widehat{V}(t, \Psi) = \int\limits_{\mathbb{R}^n} d\vec{y}\, \Psi^*(\vec{y}, t)V(\hat{z}, \hat{w}, t)\Psi(\vec{y}, t), \tag{4}$$

самосопряжённые в L_2 операторы $H(\hat{z}, t)$, $V(\hat{z}, \hat{w}, t)$ – функции от некоммутирующих операторов

$$\hat{z} = (-i\hbar\partial/\partial\vec{x}, \vec{x}), \quad \hat{w} = (-i\hbar\partial/\partial\vec{y}, \vec{y}), \quad \vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^n.$$

Функция Ψ^* комплексно сопряжена к Ψ, $\varkappa$ – вещественный параметр, $\hbar$ — “малый параметр”, $\hbar \in (0, 1)$.

Асимптотические по малому параметру $\hbar$ решения уравнения (1) строятся в классе траекторно-сосредоточенных функций $\mathcal{P}_\hbar^t$

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_\hbar^t &= \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t,\hbar),S(t,\hbar)) = \\ &= \Big\{\Phi : \Phi(\vec{x},t,\hbar) = \varphi\Big(\frac{\Delta\vec{x}}{\sqrt{\hbar}},t,\sqrt{\hbar}\Big)\exp[\frac{i}{\hbar}(S(t,\hbar)+\langle\vec{P}(t,\hbar),\Delta\vec{x}\rangle)]\Big\},\end{aligned} \qquad (5)$$

где комплекснозначная функция $\varphi(\vec{\xi},t,\sqrt{\hbar})$ принадлежит пространству Шварца $\mathbb{S}$ по переменной $\vec{\xi}\in\mathbb{R}^n$, гладким образом зависит от t и регулярно зависит от $\sqrt{\hbar}$ при $\hbar\to 0$. Здесь $\Delta\vec{x}=\vec{x}-\vec{X}(t,\hbar)$, а вещественная функция $S(t,\hbar)$ и $2n$-мерная вектор-функция $Z(t,\hbar)=(\vec{P}(t,\hbar),\vec{X}(t,\hbar))$, характеризующие класс $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t,\hbar),S(t,\hbar))$, регулярно зависят от $\sqrt{\hbar}$ в окрестности $\hbar=0$ и *подлежат определению* при $t>0$; $S(0,\hbar)=0$ и $Z(0,\hbar)=z_0=(\vec{p}_0,\vec{x}_0)$ – произвольная точка фазового пространства $\mathbb{R}^{2n}_{px}$. Приводятся основные свойства класса траекторно-сосредоточенных функций, необходимые для построения асимптотических решений уравнения типа Хартри (1).

Процедура построения решения задачи Коши (1), (2) существенно использует решения динамической системы Гамильтона–Эренфеста (система уравнений для средних и центральных моментов). Для построения асимптотических решений уравнения типа Хартри с точностью до $O(\hbar^{3/2})$ необходимо знать решения системы Гамильтона–Эренфеста второго порядка

$$\begin{gathered}\dot{z} = J\nabla_z H^{\varkappa}(z,w,\Delta)|_{w=z},\\ \dot{\Delta} = JM_{\varkappa}(z)\Delta - \Delta M_{\varkappa}(z)J, \quad \Delta^{\intercal}=\Delta,\end{gathered} \qquad (6)$$

где

$$\begin{gathered}H^{\varkappa}(z,w,\Delta) = H(z)+\tilde{\varkappa}V(z,w,t)+\frac{1}{2}\mathrm{Sp}((H_{zz}(z)+\tilde{\varkappa}V_{zz}(z,w)+\tilde{\varkappa}V_{ww}(z,w))\Delta);\\ M_{\varkappa}(z) = \frac{\partial^2}{\partial z^2}H^{\varkappa}(z,z,0) = H_{zz}(z)+\tilde{\varkappa}V_{zz}(z,w)|_{w=z}.\end{gathered} \qquad (7)$$

С помощью решений системы Гамильтона–Эренфеста задача интегрирования нелинейного уравнения типа Хартри сводится к известной задаче построения асимптотических решений линейного ассоциированного уравнения Шрёдингера.

Конструкции, представленные в первой главе, используются в последующих главах для построения интересующих нас решений.

Во **второй главе диссертации** представлен основной результат работы. В главе развивается метод построения квазиклассических спектральных серий нелинейного оператора типа Хартри (асимптотических решений стационарного уравнения типа Хартри)

$$\widehat{H}_{\varkappa}\Psi = E\Psi, \qquad (8)$$

отвечающих точке покоя системы Гамильтона–Эренфеста.

Получены асимптотические (mod $\hbar^{3/2}$) выражения для собственных значений и собственных функций оператора типа Хартри

$$E_\nu(\hbar) = H(z_*(\hbar)) + \hbar\sum_{k=1}^{n}\Omega_k\Big(\nu_k+\frac{1}{2}\Big) +$$

$$+\tilde{\varkappa}(V(z_*(\hbar), z_*(\hbar)) + \frac{1}{2}\mathrm{Sp}(V_{ww}(z_*(\hbar), z_*(\hbar)))\Delta_*^0), \tag{9}$$

$$\psi_\nu(\vec{x},\hbar) = N_\nu \exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle\vec{P}_*(\hbar), \vec{x}-\vec{X}_*(\hbar)\rangle\right]\times$$

$$\times\exp\left[\frac{i}{2\hbar}\langle\vec{x}-\vec{X}_*(\hbar), B(z_*^0)C^{-1}(z_*^0)(\vec{x}-\vec{X}_*(\hbar)\rangle\right]\frac{1}{\sqrt{\mathrm{detC(z_*^0)}}}\Big[\hat{\Lambda}^+(0)\Big]^\nu 1, \tag{10}$$

где $Z_*(\hbar) = Z_*^0 + \hbar Z_*^1$, Δ_*^0 — устойчивая (mod $\hbar^{3/2}$) в линейном приближении точка покоя системы Гамильтона–Эренфеста второго порядка (6), величины $i\Omega_k$ — собственные числа матрицы $JM_\varkappa(z_*^0)$.

Матрицы $B(z_*^0), C(z_*^0)$ определяются соотношением

$$B(t) = B(z_*^0)\mathrm{diag}(\exp[\mathrm{i}\Omega_1\mathrm{t}],\ldots,\exp[\mathrm{i}\Omega_\mathrm{n}\mathrm{t}]),$$
$$C(t) = C(z_*^0)\mathrm{diag}(\exp[\mathrm{i}\Omega_1\mathrm{t}],\ldots,\exp[\mathrm{i}\Omega_\mathrm{n}\mathrm{t}]),$$

где матрицы $B(t)$ и $C(t)$ являются решением системы в вариациях в матричной форме

$$\begin{pmatrix}\dot{B}\\ \dot{C}\end{pmatrix} = JM_\varkappa(z_*^0)\begin{pmatrix}B\\ C\end{pmatrix}. \tag{11}$$

Оператор рождения $\hat{\Lambda}^+(0)$ определяется формулой

$$\hat{\Lambda}_j^+(0) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\langle\vec{z}_j^*, \hat{\vec{p}}\rangle - \langle\vec{w}_j^* - B(z_*^0)C^{-1}(z_*^0)\vec{z}_j^*, \vec{x}-\vec{X}_*\rangle), \tag{12}$$

а $\vec{w}_j \in \mathbb{C}^n$, $\vec{z}_j \in \mathbb{C}^n$ — столбцы матриц $B(z_*^0)$, $C(z_*^0)$, соответственно. Звездочка над векторами $\vec{z}_j^*$, $\vec{w}_j^*$ означает комплексное сопряжение.

Разработанный метод построения квазиклассических спектральных серий нелинейного оператора типа Хартри проиллюстрирован рядом примеров.

Рассмотрен трехмерный оператор типа Хартри с квадратичным потенциалом в нелинейной части и с гамильтонианом линейной части отвечающей суперпозиции поля осциллятора и постоянного магнитного поля

$$\widehat{H} = \Big(\frac{\hat{\vec{p}}}{2m} - \frac{e}{2c}[\vec{H},\vec{x}]\Big)^2 + \frac{\rho(\langle\vec{x},\hat{\vec{p}}\rangle + \langle\hat{\vec{p}},\vec{x}\rangle)}{2} + \frac{k\vec{x}^2}{2},$$
$$\widehat{V}(\Psi) = \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^3} dy\,[a\vec{x}^2 + 2b\langle\vec{x},\vec{y}\rangle + c\vec{y}^2]|\Psi(\vec{y})|^2. \tag{13}$$

Здесь a, b, c – параметры нелокального потенциала; m, k, ρ – параметры системы; $\vec{H}$ – напряженность внешнего магнитного поля, $[\vec{H},\vec{x}]$ – векторное произведение в $\mathbb{R}^3$; $\vec{H},\vec{x},\vec{y}\in\mathbb{R}^3$.

Системе (13) отвечает следующая спектральная серия:

$$\psi_\nu(\vec{x})=\frac{1}{\sqrt{\nu!}}\frac{\sqrt{i}m^{3/4}\Omega_3^{1/4}\omega_a^{1/2}}{(\pi\hbar)^{3/4}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\Big(\frac{1}{2}\langle\vec{\chi},Q_0\vec{\chi}\rangle\Big)\right\}H_\nu(\vec{\xi}),\tag{14}$$

$$E_\nu=\hbar\sum_{k=1}^{3}(\Omega_k+\tilde{\Omega}_k)\Big(\nu_k+\frac{1}{2}\Big).\tag{15}$$

Здесь

$$\Omega_\eta=(-1)^\eta\frac{\omega_c}{2}+\omega_a;\quad \Omega_3=\sqrt{\frac{k+\tilde{\varkappa}a}{m}-\rho^2},\tag{16}$$

$$\tilde{\Omega}_1=\tilde{\Omega}_2=\frac{\tilde{\varkappa}c}{2m\omega_a},\quad \tilde{\Omega}_3=\frac{\tilde{\varkappa}c}{2m\Omega_3};\tag{17}$$

$$\eta=1,2;\qquad \omega_c=\frac{eH}{mc};\qquad \omega_a=\sqrt{\frac{e^2H^2}{4m^2c^2}+\frac{k+\tilde{\varkappa}a}{m}-\rho^2},\tag{18}$$

а $H_\nu(\vec{\xi})$ — многомерные полиномы Эрмита, порожденные матрицей $\tilde{W}$:

$$\vec{\xi}=-i\sqrt{\frac{m}{\hbar}}\begin{pmatrix}\sqrt{\omega_a} & i\sqrt{\omega_a} & 0\\ \sqrt{\omega_a} & -i\sqrt{\omega_a} & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2\Omega_3}\end{pmatrix}\vec{\chi},\quad \tilde{W}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},\tag{19}$$

$$\vec{\chi}=G^{\intercal}\vec{x},\quad G=(\vec{e}_\varphi,\vec{e}_\theta,\vec{e}_n)=\begin{pmatrix}\sin\varphi & \cos\varphi\cos\theta & \cos\varphi\sin\theta\\ -\cos\varphi & \sin\varphi\cos\theta & \sin\varphi\sin\theta\\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}.\tag{20}$$

Здесь полярный угол φ и азимутальный угол θ определяют направление магнитного поля $\vec{H}$.

Найден спектр одномерного оператора типа Хартри вида

$$\widehat{H}=\frac{\mu\hat{p}^2}{2}+\frac{\sigma x^2}{2}+\frac{\rho(x\hat{p}+\hat{p}x)}{2},$$
$$\widehat{V}(\Psi)=\frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dy\,[ax^2+2bxy+cy^2]|\Psi(y)|^2.\tag{21}$$

Здесь a, b, c – параметры нелокального потенциала; μ, σ, ρ – параметры системы; $x,y\in\mathbb{R}^1$.

Собственные функции оператора Хартри (21) имеют вид

$$\psi_\nu(x)=\frac{i^\nu}{\sqrt{\nu!}}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}\Big)^\nu\Big(\frac{1}{\pi\hbar}\Big)^{1/4}\Big(\frac{\Omega}{\mu}\Big)^{1/4}\exp\Big\{-\frac{i}{2\hbar}\frac{\rho}{\mu}x^2-\frac{1}{2\hbar}\frac{\Omega}{\mu}x^2\Big\}H_\nu\Big(\sqrt{\frac{\Omega}{\hbar\mu}}x\Big),\tag{22}$$

где $H_\nu(\zeta)$ — стандартизированные полиномы Эрмита, $\Omega = \sqrt{(\sigma + \tilde{\varkappa} a)\mu - \rho^2}$. Отвечающие им собственные значения определяются выражением

$$E_\nu = \hbar\Big(\nu + \frac{1}{2}\Big)\Big(\Omega + \frac{\tilde{\varkappa} c\mu}{2\Omega}\Big). \tag{23}$$

Отметим, что асимптотический по своей сути метод построения спектральных серий дает точные ответы для уравнения типа Хартри с квадратичным потенциалом.

В качестве примера возможного обобщения метода построены квазиклассические спектральные серии двухкомпонентного оператора Хартри с нелинейным потенциалом гауссовского вида

$$\widehat{H}_\varkappa(\psi_n)\psi_n(\vec{x}) = E_n\psi_n(\vec{x}), \tag{24}$$

где

$$\widehat{H}_\varkappa(\psi_n) = \widehat{H} + \varkappa\hat{V}(\psi_n), \quad \widehat{H} = \widehat{H}_0\mathbb{I} + \mu\hbar(\vec{\sigma}, \vec{H}), \tag{25}$$

$$\widehat{H}_0 = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{m} + k_1x_1^2 + k_2x_2^2 + k_3x_3^2\right), \tag{26}$$

$$\widehat{V}(\psi)\psi = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \psi^\dagger(\vec{y})Ve^{-\dfrac{(\vec{x}-\vec{y})^2}{2\gamma^2}}\psi(\vec{y})d\vec{y}\,\psi,$$

$$V = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} = V_0\mathbb{I} + (\vec{\sigma}, \vec{A}). \tag{27}$$

Здесь $\psi(\vec{x}) = (\psi^1(\vec{x}), \psi^2(\vec{x}))^\intercal$ – *двухкомпонентная* функция, $\psi^\dagger(\vec{x}) = (\psi^{1*}(\vec{x}), \psi^{2*}(\vec{x}))$ – эрмитово сопряженная функция, n – набор квантовых чисел; (k_l, γ, μ, m) – неотрицательные константы, $\varkappa$ – параметр нелинейности ($\varkappa > 0$), $\vec{H}$ – постоянный вектор, V – постоянная матрица, $V_0 = \mathrm{Sp}V/2$, $A_l = \mathrm{Sp}(V\sigma_l)/2$, σ_l-матрицы Паули, $l = (1, 2, 3)$, $\mathbb{I}$ – единичная матрица 2×2.

Спектральные серии двухкомпонентоного нелинейного оператора Хартри (25) имеют вид

$$\psi_n(\vec{x}) = r_\xi\tilde{\psi}_\nu(\vec{x}, \xi), \quad \xi = \pm 1;$$

$$E_n = \xi\mu H + \sum_{j=1}^{3}\hbar\left(\Omega_j\,(\xi) - \mathrm{sign}(V_0)\frac{\Omega_{\mathrm{nl}}^2}{\Omega_j(\xi)} - \xi\mathrm{sign}(\langle\vec{\alpha}, \vec{A}\rangle)\frac{\tilde{\Omega}_{\mathrm{nl}}^2}{\Omega_j(\xi)}\right) + \tilde{E}(\xi).$$

Здесь

$$r_+ = \frac{1}{\sqrt{2H(H - H_3)}}\begin{pmatrix} H_1 - iH_2 \\ H - H_3 \end{pmatrix}, \quad r_- = \frac{1}{\sqrt{2H(H - H_3)}}\begin{pmatrix} H_3 - H \\ H_1 + iH_2 \end{pmatrix},$$

$$\Omega_j^2(\xi) = \frac{k_j}{m} - \frac{\varkappa(V_0 + \xi(\vec{\alpha}, \vec{A}))}{2\gamma^2 m}, \quad \vec{\alpha} = \frac{\vec{H}}{H},$$
$$\Omega_{\rm nl}^2 = \mathrm{sign}(V_0)\frac{\varkappa V_0}{\gamma^2 m}, \quad \tilde{\Omega}_{\rm nl}^2 = \mathrm{sign}(\langle\vec{\alpha}, \vec{A}\rangle)\frac{\varkappa\langle\vec{\alpha}, \vec{A}\rangle}{\gamma^2 m}, \quad \mathrm{sign}(a) = \frac{a}{|a|}.$$

В **третьей главе диссертации** в качестве приложения развитого метода построения квазиклассических спектральных серий получены стационарные состояния бозе-эйнштейновского конденсата и проанализировано соответствие полученных решений с известными теоретическими и экспериментальными результатами.

Состояние конденсата определяется решением уравнения

$$\Big[-i\hbar\partial_t + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V_{\rm ext}(\vec{x}) + \int\limits_{\mathbb{R}^3} d\vec{y}\,\Psi^*(\vec{y},t)V(|\vec{x}-\vec{y}|)\Psi(\vec{y},t))\Big]\Psi(\vec{x},t) = 0. \tag{28}$$

Функция $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ определяет плотность распределения конденсата, $N[\Psi] = ||\Psi(\vec{x},t)||^2 = \int_{\mathbb{R}^3}|\Psi(\vec{x},t)|^2 d\vec{x}$ — число частиц конденсата. Слагаемое $V_{\rm ext}(\vec{x})$ описывает поле внешней ловушки, $V(|\vec{x}-\vec{y}|)$ является потенциалом парного взаимодействия частиц системы. Уравнение (28) — нестационарное уравнение типа Хартри, которое в теории БЭК принято называть нелокальным уравнением Гросса–Питаевского.

В работе рассматривается осцилляторный внешний потенциал $V_{\rm ext}(\vec{x}) = m(\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2)/2$, а потенциал парного взаимодействия выбирается в виде

$$V(|\vec{x}-\vec{y}|) = \frac{V_0}{(\sqrt{2\pi})^3\gamma^3}\exp\Big[-\frac{(\vec{x}-\vec{y})^2}{2\gamma^2}\Big]. \tag{29}$$

Здесь параметр γ характеризует радиус взаимодействия r_0.

На основе результатов второй главы построены выражения для квазиклассических стационарных состояний бозе-эйнштейновского конденсата

$$\rho(\vec{x}) = \frac{N\pi^{-3/2}}{b_1 b_2 b_3}\exp\Big[-\frac{x_1^2}{b_1^2}\Big]\exp\Big[-\frac{x_2^2}{b_2^2}\Big]\exp\Big[-\frac{x_3^2}{b_2^2}\Big], \quad \vec{v}(\vec{x}) = 0. \tag{30}$$

$$\mu = m\gamma^2\Omega_{\rm nl}^2 + \frac{\hbar}{2}\sum_{i=1}^{3}\Big[1 - \xi\frac{\Omega_{\rm nl}^2}{2\Omega_i^2}\Big]\Omega_i, \tag{31}$$

$$b_i = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega_i}}, \quad \Omega_i^2 = \omega_i^2 - \xi\Omega_{\rm nl}^2, \qquad \Omega_{\rm nl}^2 = \xi\frac{NV_0}{(\sqrt{2\pi})^3 m\gamma^5}, \quad \xi = \mathrm{sign}(V_0). \tag{32}$$

Здесь $\rho(\vec{x})$ — плотность распределения конденсата, μ — его химический потенциал.

Распределение плотности конденсата (30) имеет форму трехмерного гауссового пакета. Характерные длины конденсата b_i можно записать следующим образом: $b_i = \beta_i a_i$, где $\beta_i = (1 - \xi\Omega_{\rm nl}^2/\omega_i^2)^{-1/4}$ — масштабирующие коэффициенты,

$a_i = \sqrt{\hbar/m\omega_i}$ — характерные длины идеального БЭК в гармонической ловушке. Таким образом, в рамках предложенной модели влияние взаимодействия проявляется в деформации гауссового распределения плотности. В случае притягивающего взаимодействия ($V_0 < 0$) распределение конденсата становится уже, а максимум интенсивности выше. При отталкивающем взаимодействии ($V_0 > 0$) распределение становится шире, а пик интенсивности ниже. Такая зависимость качественно согласуется с экспериментальными данными[1] и результатами теоретических исследований[2]. На рис. 1, 2 представлена зависимость плотности распределения конденсата от радиального расстояния $\rho(r)$ в сферически симметричной ловушке $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ для различных значений $\Omega_{\rm nl}^2/\omega^2$.

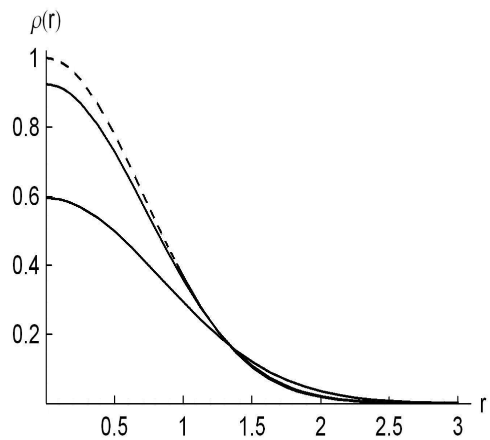

Рис. 1: Зависимость плотности распределения конденсата от радиального расстояния в сферически симметричной ловушке ($\xi = 1$) при $\Omega_{\rm nl}^2/\omega^2 = 0$ (штриховая линия), $\Omega_{\rm nl}^2/\omega^2 = 0.1$ (средняя линия), $\Omega_{\rm nl}^2/\omega^2 = 0.5$ (нижняя линия).

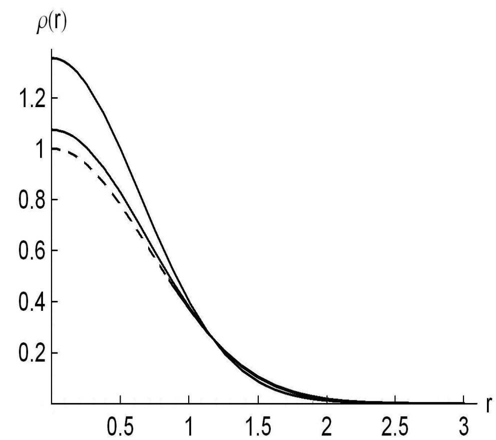

Рис. 2: Зависимость плотности распределения конденсата от радиального расстояния в сферически симметричной ловушке ($\xi = -1$) при $\Omega_{\rm nl}^2/\omega^2 = 0$ (штриховая линия), $\Omega_{\rm nl}^2/\omega^2 = 0.1$ (средняя линия), $\Omega_{\rm nl}^2/\omega^2 = 0.5$ (верхняя линия).

Также в данной главе исследована проблема расширения бозе–эйнштейновского конденсата при отключении внешнего поля ловушки.

В **четвертой главе диссертации** решается задача о построении решений уравнения типа Хартри в адиабатическом приближении и нахождении соответствующих фаз Берри.

Предположим, что оператор Хартри $\widehat{H}_\varkappa(R(t),\Psi)$ медленно (адиабатически) изменяется со временем

$$\{-i\hbar\partial_t + \widehat{H}_\varkappa(R(t),\Psi)\}\Psi = 0, \tag{33}$$

$$\widehat{H}_\varkappa(R(t),\Psi) = \widehat{H}(R(t)) + \varkappa\widehat{V}(R(t),\Psi). \tag{34}$$

Здесь $R(t)$ — набор T — периодических параметров, от которых зависит гамильтониан. Поставим для уравнения (33) начальные условия в виде собственных функ-

[1] L. V. Hau, B. D. Busch, C. Liu, Z. Dutton, M. M. Burns, and J. A. Golovchenko, 1998, *Near-resonant spatial images of confined Bose-Einstein condensates in a 4-Dee magnetic bottle* Phys. Rev. A 58, R54.

[2] Dalfovo, F., and S. Stringari, 1996, *Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices* Phys. Rev. A 53, 2477.

ций (10) мгновенного оператора Хартри $\widehat{H}_\varkappa(R(t_0),\Psi)$ в начальный момент времени:

$$\Psi(\vec{x},t,\hbar)|_{t=t_0}=\psi_\nu(\vec{x},R(t_0),\hbar). \tag{35}$$

Далее без ограничения общности будем считать, что $t_0=0$.

Так как параметры системы меняются медленно, наряду с "быстрым" временем t, входящим в оператор дифференцирования, введем "медленное" время s, от которого зависят параметры системы — $R(t)=R(s)$. Здесь $s=t/T$, T — период адиабатической эволюции.

Для нахождения фазы Берри использован подход, развитый для линейных уравнений. Этот подход основан на точном (или приближённом) решении задачи Коши (33), (35), которое в дальнейшем разлагается по параметру адиабатичности.

Решение задачи Коши (33), (35) можно представить в виде

$$\Psi(\vec{x},t,\hbar)=\Psi_\nu^{(0)}(\vec{x},t,\hbar)+O\Big(\frac{1}{T}\Big), \tag{36}$$

$$\Psi_\nu^{(0)}(\vec{x},t,\hbar)=\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}T\int\limits_0^s E_\nu(\tau)d\tau+i\gamma_\nu(s)\Big]\psi_\nu(\vec{x},R(s),\hbar). \tag{37}$$

Функция (37) — решение уравнения типа Хартри в адиабатическом приближении. Рассматривая эволюцию за период, получим

$$\Psi_\nu^{(0)}(\vec{x},T)=\exp\Big\{-\frac{i}{\hbar}T\int\limits_0^1 E_\nu(s)ds+i\gamma_\nu(T)\Big\}\Psi_\nu^{(0)}(\vec{x},0). \tag{38}$$

Здесь $\gamma_\nu(T)$ — фаза Берри. Как и в случае "линейной" квантовой механики, решение уравнения типа Хартри в адиабатическом приближении остается собственной функцией нелинейного оператора $\widehat{H}_\varkappa$ и за время адиабатической эволюции приобретает лишь фазовый множитель. Однако в отличие от линейного случая, фаза Берри $\gamma_\nu(T)$ нелинейного уравнения типа Хартри не может быть подсчитана посредством формулы

$$\gamma_\nu^{\rm lin}(T)=i\int\limits_0^T\langle\psi_\nu(\vec{x},R(t))|\dot{\psi}_\nu(\vec{x},R(t))\rangle dt. \tag{39}$$

Это связано с тем, что при выводе формулы (39) использован линейный принцип суперпозиции решений.

В работе получено явное выражение для фазы Берри системы (33).

В качестве иллюстрации полученных результатов построены в явном виде выражения для фаз Берри трехмерной (13) и одномерной (21) систем, в предположении, что параметры этих систем медленно меняются со временем. Для системы

(13) имеем следующий набор параметров: $R(s)$=$(m(s)$, $k(s)$, $\rho(s)$, $\vec{H}(s)$, $a(s)$, $b(s)$, $c(s))$. Соответствующее выражение для фазы Берри имеет вид

$$\begin{aligned}\gamma_\nu(T) = \sum_{k=1}^{2}\Big(\nu_k+\frac{1}{2}\Big)\oint\Big[1-\frac{\tilde{\varkappa}c}{2m\omega_a^2}\Big]\frac{1}{2\omega_a}\Big(\frac{\rho}{m}dm+d\rho\Big)+\\ +\Big(\nu_3+\frac{1}{2}\Big)\oint\Big[1-\frac{\tilde{\varkappa}c}{2m\Omega_3^2}\Big]\frac{1}{2\Omega_3}\Big(\frac{\rho}{m}dm+d\rho\Big)+\\ +(\nu_2-\nu_1)\oint\limits_C\frac{H_3}{H(H_1^2+H_2^2)}[H_1dH_2-H_2dH_1].\end{aligned} \tag{40}$$

Здесь H_1, H_2, H_3 – компоненты магнитного поля, $H=\sqrt{H_1^2+H_2^2+H_3^2}$; C – контур в пространстве параметров, описываемый при эволюции системы.

Система (21) зависит от времени через набор параметров $R(s)$=$(\mu(s)$, $\sigma(s)$, $\rho(s)$, $a(s)$, $b(s)$, $c(s))$. Фаза Берри определяется выражением

$$\gamma_\nu(T)=(\nu+\frac{1}{2})\oint\limits_C[1-\frac{\tilde{\varkappa}c}{2}\frac{\mu}{\Omega^2}]\frac{1}{2\Omega}(d\rho-\frac{\rho}{\mu}d\mu), \tag{41}$$

Здесь C – замкнутый контур в пространстве параметров. Выражение для фазы Берри можно представить в форме интеграла по поверхности Π в пространстве параметров, опирающейся на контур C:

$$\begin{aligned}\gamma_\nu(T)=\Big(\nu+\frac{1}{2}\Big)\int\int\limits_\Pi\frac{1}{4\Omega^3}\{\bar\sigma(d\rho\wedge d\mu)+\rho(d\mu\wedge d\bar\sigma)+\mu(d\bar\sigma\wedge d\rho)\}-\\ -\frac{\tilde{\varkappa}c}{2}\frac{3\mu}{4\Omega^5}\{\tilde\sigma(d\rho\wedge d\mu)+\rho(d\mu\wedge d\tilde\sigma)+\mu(d\tilde\sigma\wedge d\rho)\},\\ \tilde\sigma=\sigma+\tilde{\varkappa}a,\quad \bar\sigma=\sigma+\tilde{\varkappa}(a+c),\quad \Omega=\sqrt{[\sigma+\tilde{\varkappa}a]\mu-\rho^2}.\end{aligned} \tag{42}$$

Отличие фазы Берри уравнения типа Хартри от фазы линейного уравнения Шрёдингера ($\tilde{\varkappa}=0$) состоит в изменении частоты $\Omega(s)$ и появлении дополнительного слагаемого

$$-\Big(\nu+\frac{1}{2}\Big)\oint\limits_C\frac{\tilde{\varkappa}c(s)}{2}\frac{\mu(s)}{\Omega^2(s)}\frac{1}{2\Omega(s)}\Big[d\rho-\frac{\rho(s)}{\mu(s)}d\mu\Big]. \tag{43}$$

Отметим, что все полученные выражения в предельном случае $\varkappa\to 0$ совпадают с известными результатами для линейного уравнения Шрёдингера.

В **приложении А** приведены свойства системы в вариациях, необходимые для полноты изложения.

В **приложении В** приведены необходимые сведения о многомерных полиномах Эрмита.

В **заключении** перечислены основные результаты, полученные в диссертации и выносимые на защиту.

Основные работы, опубликованные по теме диссертации:

1. Литвинец Ф.Н., Трифонов А.Ю., Шаповалов А.В. Фаза Ааронова–Анандана для уравнения типа Хартри с квадратичным потенциалом // Новейшие проблемы теории поля: Труды XIV Международной летней школы-семинара по современным проблемам теоретической и математической физики / Под ред. А.В. Аминовой. — Казань: Изд-во «РегентЪ», 2004. — С. 203-216.
2. Лисок А.Л., Литвинец Ф.Н., Трифонов А.Ю., Шаповалов А.В. Геометрические фазы и квазиэнергетические спектральные серии уравнения типа Хартри с квадратичным потенциалом // Известия ВУЗов. Физика. — 2004. — Т. 47, № 4. — С. 55-62.
3. Litvinets F.N., Trifonov A.Yu., Shapovalov A.V. Berry phases for the nonlocal Gross-Pitaevskii equation with a quadratic potential // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 2006. — V. 39. — P. 1191-1206.
4. Литвинец Ф.Н., Трифонов А.Ю., Шаповалов А.В. Фазы Берри уравнения типа Хартри с квадратичным потенциалом // Новейшие проблемы теории поля: Труды XVI Международной летней школы-семинара по современным проблемам теоретической и математической физики / Под ред. А.В. Аминовой. — Казань: Изд-во «РегентЪ», 2006. — С. 155-172.
5. Литвинец Ф.Н., Трифонов А.Ю., Белов В.В. Квазиклассические спектральные серии оператора типа Хартри, отвечающие точке покоя классической системы Гамильтона–Эренфеста // Теоретическая и математическая физика. — 2007. — Т. 150, № 1. — С. 26-40.
6. Кирнос И.В., Литвинец Ф.Н., Трифонов А.Ю., Шипуля М.А. Квазиклассические спектральные серии двухкомпонентного оператора типа Хартри // Известия ВУЗов. Физика. — 2007. — Т. 50, № 6. — С. 77-81.
7. Litvinets F.N., Trifonov A.Yu., Shapovalov A.V. Berry phases for 3D Hartree type equations with a quadratic potential and a uniform magnetic field // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2007. — V. 40. — P. 11129-11149.